

**Ferrum effect of impurities (Fe) on the quality of polycrystalline silicon at rectification
Chotonov B. (Republic of Kyrgyzstan)**

**Влияние примеси феррума (Fe) на качество поликристаллического кремния
при ректификации**

Чотонов Б. Б. (Кыргызская Республика)

*Чотонов Бекмолдо Баймырзаевич / Chotonov Bekmoldo Baimyrzaevich - кандидат физико-математических наук,
доцент,*

Научный институт энергетики и геоэкологии, г. Жалал-Абад, Кыргызская Республика

Аннотация: в статье рассмотрено влияние примеси феррума (Fe) на качество получаемого поликристаллического кремния при ректификационной очистке.

Abstract: the article considers the influence of impurities Ferrum (Fe) on the quality of the polycrystalline silicon rectification cleaning.

Ключевые слова: поликристаллический кремний, примесь, ректификация.

Keywords: polycrystalline silicon, admixture, rectification.

Кремний встречается в природе чуть менее часто, чем кислород. Этот элемент составляет свыше 25 процентов земной коры. Однако в поликристаллическом виде считается дорогим и дефицитным материалом. Он служит основным сырьем для производства полупроводников и солнечных батарей. Около половины стоимости последних определяется ценой поликристаллического кремния. Но возможностью производства этого сырья обладают лишь несколько стран в мире.

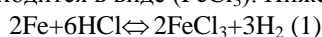
Объем мирового рынка поликристаллического кремния оценивается по итогам 2008 года в 60 тысяч тонн. Предполагается, что к 2012 году он увеличится до 120-130 тысяч тонн. Спрос на поликристаллический кремний стабильно растет примерно на 20-30 процентов в год. А правила на рынке по-прежнему диктуют несколько компаний из США, Японии, Германии и Италии. В последнее время в группу завсегдатаев этого клуба пытаются войти Китай и Россия. Вместе с ними в двери стучится Кыргызстан. Он рассчитывают выйти на мировой рынок с дешевым, но очень качественным продуктом.

В данный момент единственный в Средней Азии полупроводниковый завод АО «Таш-Кумыр Солар» испытывает трудности связанные с повышением качества выпускаемой продукции, что затрудняет выход завода на мировой рынок. Поэтому решение данной проблемы является актуальной задачей, и данная работа посвящено к решению этой задачи.

Среди многочисленных методов очистки кремния от чужеродных примесей одним из эффективным является ректификация [1, 2].

На основе термодинамических расчетов нами проведены расчеты с помощью физико-математического моделирования по определению экстенсивных параметров состояния примесей и даны предложения.

В данной работе мы рассмотрим влияние примесей феррума на качество кремния с помощью термодинамических расчетов. В работе [2] показано, что примесь феррума в трихлорсилане (SiHCl_3) находится в виде (FeCl_3). Ниже приведены реакции образующихся хлоридов этих примесей:



Основным величинам, характеризующими положение этих реакций, являются энтальпия (ΔS) [4]. Это величина вычисляются с помощью следующих формул:

$$\Delta S_T^0 = \Delta S_{298}^0 + \int_{298}^T C_p^0 / T dT \quad (2)$$

$$C_p^0 = a + bT + cT^{-2} \quad (3)$$

здесь, $b=10^{-3}$, $c=10^5$ - эмпирические постоянные

$$\Delta S_T^0 = \Delta S_{298}^0 + \int_{298}^T \left(\frac{a + bT + cT^{-2}}{T} \right) dT \quad (4), \text{ поставляя и дифференцируя (4) имеем,}$$

$$\Delta S_T^0 = \Delta S_{298}^0 + a \frac{\ln T}{298} + b(T - 298) - \frac{c}{2} \cdot \left(\frac{1}{T^2} - \frac{1}{298^2} \right) \quad (5)$$

Результаты термодинамических расчетов на основе энтропии этой реакции $2\text{Fe} + 6\text{HCl} \rightleftharpoons 2\text{FeCl}_3 + 3\text{H}_2$ представим в виде таблиц и диаграммы.

Таблица 1. Результаты термодинамических расчетов энтропии примеси феррума

Температура (К)	ΔS (Дж/мольК)	№	Температура (К)	ΔS (Дж/мольК)	№	Температура (К)	ΔS (Дж/мольК)
574	-538	1	599	-777,9	1	624	-776,6
575	-779	2	600	-777,8	2	625	-776,6
576	-778,9	3	601	-777,8	3	626	-538,2
577	-778,9	4	602	-538	4	627	-538,2
578	-538	5	603	-538	5	628	-538,2
579	-538	6	604	-538,1	6	629	-776,4
580	-538,5	7	605	-777,6	7	630	-776,3
581	-779,2	8	606	-777,5	8	631	-776,3
582	-779,2	9	607	-777,5	9	632	-538,2
583	-779,1	10	608	-538,1	10	633	-538,2
584	-538,5	11	609	-538,1	11	634	-538,2
585	-538,5	12	610	-538,1	12	635	-776,1
586	-538,5	13	611	-777,3	13	636	-776
587	-778,4	14	612	-777,2	14	637	-775,9
588	-778,4	15	613	-777,2	15	638	-538,3
589	-778,3	16	614	-538,1	16	639	-538,3
590	-538	17	615	-538,1	17	640	-538,3
591	-538	18	616	-538,1	18	641	-775,7
592	-538	19	617	-777	19	642	-775,7
593	-778,2	20	618	-776,9	20	643	-775,6
594	-778,1	21	619	-776,9	21	644	-538,3
595	-778,1	22	620	-538,1	22	645	-538,3
596	-538	23	621	-538,1	23	646	-538,3
597	-538	24	622	-538,1	24	647	-775,4
598	-538	25	623	-776,7	25	648	-775,4

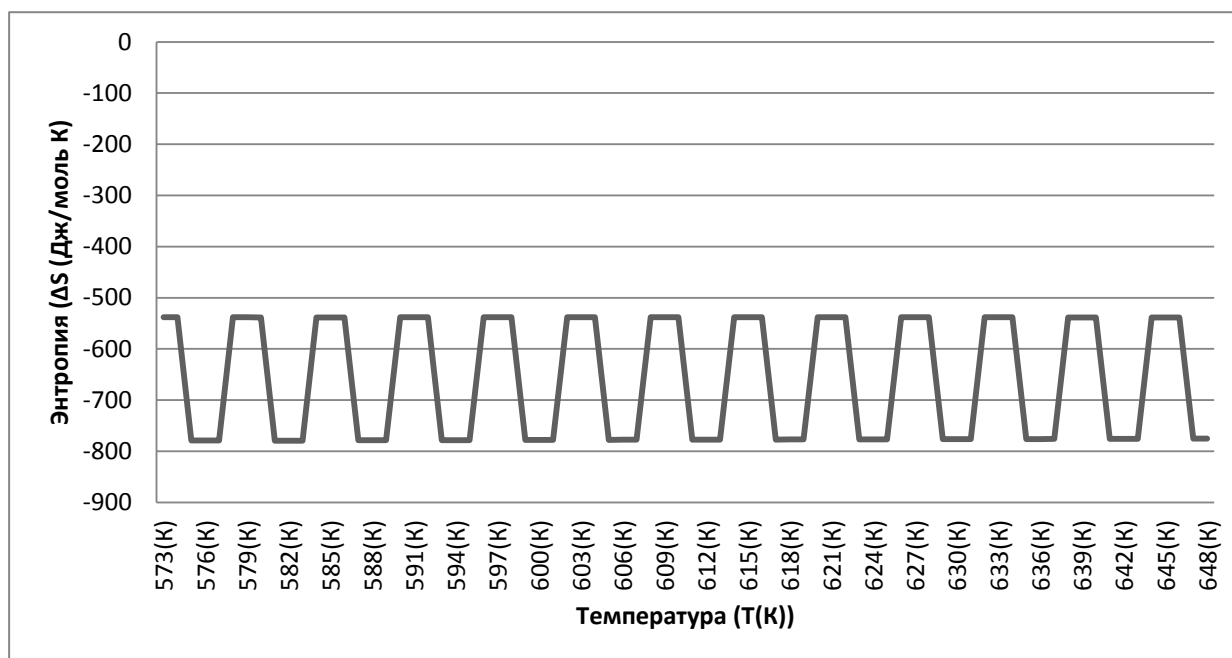


Рис. 1. Диаграмма результатов термодинамических расчетов энтропии примеси феррума

Проведем анализ полученной диаграммы:

Из диаграммы видно, что энтропия системы отрицательное число ($\Delta S < 0$). При этом примеси, не участвующие в реакциях $FeCl_3$, отрицательно влияют на качество продукции. Для достижения более

качественной очистки эти примеси должны участвовать в реакциях, а для этого необходимо увеличить энтропию (ΔS) системы.

Чем больше примеси сохраняется в конденсате, тем больше они отрицательно влияют на качество кремния [1, 2], поэтому для качественной очистки кремния от примесей необходимо увеличить энтропию системы.

Заключение

1) При ректификации для качественной очистки кремния эти примеси FeCl_3 должны участвовать в реакциях, а для этого необходимо увеличить энтальпию и энтропию системы.

2) При ректификации при помощи хлорида железа (FeCl_3) реакция не протекает, в этом случае они не выделяются от хлоридов кремния (SiHCl_3) и в большом числе сдерживается в конденсате. Поэтому эти примеси (FeCl_3) отрицательно влияют на качество поликристаллического кремния.

Литература

1. *Кудайбергенов Т. Т., Рысмендиев К. Р., Асанов У. У.* Жалпы химия жана элементтердин химиясы. Бишкек, - 1994, С. 3-254.
2. *Медведев С. А.* Введение в технологию полупроводниковых материалов. Издат. «Высшая школа» Москва, – 1970, С. 292-398 и 405-449.
3. *Угай Я. А.* Введение в химию полупроводников. Издание 2, переработанное и дополненное Москва «Высшая школа», 1975, С. 9-292.
4. *Ормонт В. Ф.* Введение в физическую химию и кристаллохимию полупроводников. Издат. «Высшая школа», Москва, - 1968, С. 3-200.
5. *Чотонов Б. Б.* Исследование термодинамических процессов очистки кремния и разработка системы контроля его качества: - дис ... канд. физ.-мат. наук: 01.04.10. – Андижан, 2002.- 127 б.